Anwendung der Transformation der Schrödingergleichung (Das Wasserstoffproblem)

Marc Grädel, Nicolas Streit

Das Wasserstoffatom ist eines der wenigen quantenmechanischen Systeme, die sich exakt berechnen lassen. Dies liegt daran, dass sich im Wasserstoffatom nur ein Elektron im kugelsymmetrischen Coulombfeld des Protons bewegt. Für diesen Fall gelten folgende Gleichungen:

1. Die Schrödingergleichung: $R''(x) + V(x) \cdot R(x) = 0$
2. Das Potential, das die Elektron-Proton-Wechselwirkung im Wasserstoffatom beschreibt: $V(x) = E - \frac{a}{x} - \frac{b}{x^2}$. Wobei E, a und b konstant sind.
3. Eine Lösung der Schrödingergleichung: $R(x) = e^{\alpha x} x^{\beta}$. Wobei α und β auch konstant sind.

a) Zu finden: α und β, so dass $R(x) = e^{\alpha x} x^{\beta}$ die Schrödingergleichung erfüllt.
Als erstes muss $R''(x)$ berechnet werden:

- $R(x) = e^{\alpha x} x^{\beta}$
- $R'(x) = \alpha x^{\beta} e^{\alpha x} + \beta x^{\beta - 1} e^{\alpha x}$
- $R''(x) = e^{\alpha x}[\alpha^2 x^{\beta} + \beta(\beta - 1)x^{\beta-2} + 2\alpha\beta x^{\beta-1}]$

Jetzt können $V(x)$ und $R(x)$ bzw. $R''(x)$ in die Schrödingergleichung eingesetzt werden. Wird die resultierende Gleichung durch $e^{\alpha x} x^{\beta} = R(x)$ geteilt, so entsteht folgende Gleichung:

$$\alpha^2 + \beta(\beta - 1)\frac{1}{x^2} + 2\alpha\beta\frac{1}{x} + (E - \frac{a}{x} - \frac{b}{x^2}) = 0 \tag{1}$$

Oder umgeformt:

$$\frac{1}{x^2}[\beta(\beta - 1)] + \frac{1}{x^1}2\alpha\beta + \frac{1}{x^0}\alpha^2 = \frac{1}{x^2}b + \frac{1}{x^1}a - \frac{1}{x^0}E \tag{2}$$

Woraus durch Koeffizientenvergleich folgendes Gleichungssystem gewonnen werden kann:

$$\begin{array}{rcl} \beta(\beta - 1) & = & b \\ 2\alpha\beta & = & a \\ -E & = & \alpha^2 \end{array} \tag{3}$$

Woraus wiederum α und β berechnet werden können:

$$\begin{array}{rcl} \alpha & = & \pm\sqrt{-E} \\ \beta & = & \pm\frac{a}{2\sqrt{-E}} \end{array} \tag{4}$$

Somit erfüllt $R(x) = e^{\pm\sqrt{-E}x} x^{\pm\frac{a}{2\sqrt{-E}}}$ die Schrödingergleichung.

b) Es soll nun ein Spezialfall der Transformation aus der letzten Übung betrachtet werden, d. h. der folgende Speziallfall von $R(x) = f(r(x)) \cdot G(r(x))$:

$$x = \frac{1}{2q+1} \cdot r^{2q+1} \text{ und } R(x) = r(x)^q \cdot G(r(x)), q \neq -\frac{1}{2} \tag{5}$$

Für diese Transformation sollen nun neue Potentiale erhalten werden, sowie eine Lösung der Schrödingergleichung für eines dieser neuen Potentiale gefunden werden.

Wir verwenden dazu die transformierte Schrödingergleichung aus der letzten Übung:

$$G''(r) + G(r) \cdot [\frac{f''(r)}{f(r)} - 2\frac{f'^2(r)}{f^2(r)} + V(x) \cdot f^4(r)] = 0 \tag{6}$$

Wobei $f(r(x)) = r(x)^q$ ist, da wir die Transformation $R(x) = f(r(x)) \cdot G(r(x)) -> R(x) = r(x)^q \cdot G(r(x))$ durchgeführt haben. Ebenfalls gilt $V(x) = E - \frac{a}{x} - \frac{b}{x^2}$. Durch einsetzen wird folgende Gleichung erhalten:

$$G''(r) + G(r) \cdot [\frac{q(q-1)r^{q-2}}{r^q} - 2\frac{(qr^{q-1})}{(r^q)^2} + (E - \frac{a(2q+1)}{r^{2q+1}} - \frac{b(2q+1)^2}{r^2(2q+1)} \cdot r^{4a}] = 0 \tag{7}$$

Oder etwas vereinfacht:

$$G''(r) + G(r) \cdot [\frac{q(q-1)}{r^2} - 2\frac{q^2}{r^2} + (E - \frac{a(2q+1)}{r^{2q+1}} - \frac{b(2q+1)^2}{r^2(2q+1)} \cdot r^{4q}] = 0 \tag{8}$$

Aus der letzten Übung wissen wir, dass $G''(r(x)) = R''(x)$ und $G(r(x)) = R(x)$ gilt. Damit erhalten wir durch Vergleich von Gl. mit der ursprünglichen Schrödingergleichung $R''(x) + V(x) \cdot R(x) = 0$ und Umformen, den folgenden Ausdruck für das Potential $V(x)$:

$$V(x) = \frac{-q^2 - q - b(2q+1)^2}{r^2} + Er^{4q} - a(2q+1)r^{2q-1} \tag{9}$$

Schliesslich kann mithilfe des Resultats aus a) und den angewandten Transformationen $x = \frac{1}{2q+1} \cdot r^{2q+1}$ und $R(x) = r(x)^q \cdot G(r(x))$ eine Lösung der Schrödingergleichung berechnet werden:

$$R(x) = r^q \cdot G(r) \Leftrightarrow G(r) = \frac{R(x)}{r^q} = \frac{e^{\alpha x} x^\beta}{r^q} \Rightarrow G(r) = \frac{e^{\alpha \frac{r^{2q+1}}{2q+1}} \cdot (\frac{r^{2q+1}}{2q+1})^\beta}{r^q} \tag{10}$$

References

[1] Steiger, A.: Anwendungsübungen MATL, (2017). Studiengang Materialwissenschaft, ETH Zürich.